

从外行人的眼里远看“21 世纪的分析化学”

徐光宪*

(北京大学化学学院,北京 100871)

[摘要] 本文论述了分析化学学科的地位;在梳理了现代各种分析方法的基础上,提出了分析化学的难题与挑战,指明了 21 世纪分析化学的发展战略。

[关键词] 分析化学,难题与挑战,分析化学发展战略

汪尔康院士主编,很多位院士和专家参加执笔的《21 世纪的分析化学》(科学出版社,1999)已对 21 世纪分析化学的发展做了很全面、很好的展望。国家自然科学基金委员会也对分析化学学科的基础研究的优先资助领域提出很好的建议。我这里想说的是从外行人的视角,远远地、模糊地看分析化学,他看到的是什么呢?

第一,我看到分析化学的地位,越来越重要了。我觉得一门学科的定位是与时俱进的。恩格斯把 19 世纪的化学定位为原子的科学,因为化学变化是原子的几何位置移动,而原子本身不变的变化。20 世纪的化学被定位为分子的科学,因为在这一世纪中化学家合成了 2000 多万种新分子和化合物。

我在 2004 年 6 月 18 日,查了 CAS Reg No 登录的分子数共有 6669 万个,平均每天增加 20 000 个,其中合成新的有机和无机化合物 2345 万个,识别的生物分子序列(biosequences)4324 万个。识别和创造的分子数之比是 2:1。所以我觉得 21 世纪的化学可以定位为“创造和识别泛分子的科学”。

以前我认为化学的核心是合成化学,现在看来化学的核心任务应该有两个:合成化学与广义的分析化学(包括分子识别和序列测定、结构分析、形貌分析及粒度分析和物质成像等)。分析化学的地位已上升到前所未有的高度。化学的主要应用领域也有两个:材料化学与生命化学,此外还有环境化学和能源化学等。

近 20 年来,国内外产生了淡化化学的思潮。

“Chemistry is to a large extent invisible in newspapers, news magazines, TV and radio” (引自《Beyond Molecular Frontier》, p184, 中译本《超越分子前沿》, 147 页, 科学出版社, 2004)。不少社会人士认为化学已是一二百年老科学,提不出重大的奋斗目标和振奋人心的大计划。其实 20 世纪最伟大的科学工程之一,报刊上广为宣传的“人类基因计划”,实质上是“人类基因的化学测序计划”。这一计划虽是生物学家提出来的,却是分析化学家完成的。但分析化学家非常谦虚,很少在报刊上宣传。

现在到了 21 世纪,平均每天要分析和识别 13 000 多个生物分子序列,这是分析化学家很大很光荣的任务。生命分析化学在后基因组学、蛋白质组学、代谢组学等生命科学的前沿领域中非常重要。我希望化学家、分析化学家要 Aggressive,要提出能引起社会重视、领导关注的重大任务、目标和计划来。

我的第二点看法是:有少数人认为化学是一堆白菜,提不出世纪难题来。其实根据上述化学的两大核心任务和两大应用领域,就可提出 21 世纪化学的四大难题:(1)合成化学难题—化学反应和自组装规律、合成方法学、分离理论及方法;(2)分析化学难题;(3)材料化学难题—广义结构(包括构型、构象、手性、粒子尺度、形状和形貌等)和广义性能(包括物理、化学和功能性质,生物和生理活性等)之间的关系,其中包含纳米尺度和性能关系的特殊规律;(4)生命化学难题—生命现象的化学机理。

* 中国科学院院士。
本文于 2004 年 10 月 11 日收到。

物理化学、理论化学、计算化学要与合成和分析化学密切结合,为解决这四大难题做出重大贡献。

关于分析化学的难题,是我要向分析化学专家请教的问题。从理论层次上,我想分析化学的难题是:原子、分子、泛分子和电磁场(光子)、电场、磁场、超声场、离心重力场、以及其他各种外场相互作用的规律。因为各种分析或识别分子的手段,大部分是依靠物质与场的相互作用来实现的。充分了解这些规律,就可为发现新的分析方法和改进现有分析方法提供基础。另有一大类分析方法是先对样品中的组分进行分离,再加检测的方法,例如各种色谱分析、电泳、质谱分析等。所以分离方法和理论既是合成化学也是分析化学需要解决的问题。

首先可以把物质与场的各种相互作用分分类,梳理一下现代各种分析方法的基础是利用什么相互作用?

第一类是分子在转动、振动、电子运动等不同的运动过程中发射、吸收、散射(弹性和非弹性)和衍射各种波段的光子的规律。

第二类是原子的核自旋或电子自旋在磁场作用下,产生核磁矩或电子磁矩能级的分裂,从而吸收或发射射频波段(核磁共振仪)或微波波段的光子(顺磁共振仪)。

第三类是原子、分子和电子束、中子束、离子束、分子束等相互作用,或再外加激光束。其中物质与电子束相互作用的仪器称为电子光学仪器,如透射电镜、扫描电镜、电子探针、电子能谱仪等。物质与中子束相互作用的如中子衍射仪。物质与离子束相互作用的称为离子光学仪器,如无机质谱、有机质谱、生物质谱、同位素质谱、离子探针等。以及各种显微镜,如原子力显微镜(AFM),激光力显微镜(LFM),静电力显微镜(EFM),弹道电子发射显微镜(BEEM),扫描隧道电位仪(STP),扫描离子电导显微镜(AICM),扫描近场光学显微镜(SNOM),光子扫描隧道显微镜(PSTM),扫描探针显微镜(SPM)等。

第四类是利用物质的不同组分在各种填料介质(或再外加电场)中不同的扩散速度进行分离,再分别测定的色谱分析法,如气相、液相色谱、纸上层析、毛细管电泳、薄层扫描色谱、离子色谱等。

第五类是化学分析法的四大平衡的发展。四大平衡是利用四对对立物的反应:酸与碱、氧化剂与还原剂、中心离子与配体、形成沉淀的软阴离子和软阳离子。我们可以搜索一下这样的对立物还有哪些?第五对是抗体和抗原,它们之间的反应有高度选择

的专一性,并可与光相互作用,已发展成为发光免疫分析。第六对是酶与底物。第七对是为人体中的十余万种蛋白质各配两把钥匙,一把开,即激发蛋白质的活性;另一把关,即抑制蛋白质的活性。第八对是生物分析中的大量新试剂。

第六类是利用其他效应,如压电效应的传感器等。

分类以后就可梳理一下,看看有哪些领域还未充分开发?例如从波段看,在远红外与微波之间,远紫外与软 X 波段之间似乎还有空挡。还有在原有波段上,如把光源改为激光,往往可使方法有很大改变。

从方法和技术的层面上,分析方法发展的趋势有:微流控芯片化、在线化、实时化、原位化、仿生化、智能化、信息化、高灵敏化、高选择性化、高通量化、无损化、单原子化和单分子化等。此外还有各种联用技术和各种批量操作技术,如分析和分离联用,分析、分离和合成联用,组合化学等。其中有我国知识产权的微流控芯片技术应予重点支持。

在这次我国中长期科学和技术发展规划的咨询工作中,很多院士和专家建议国家设立数亿元的专项基金来研究和制造大型分析仪器,改变依靠进口的局面。

从研究对象层面上有:(1)生命分析化学;(2)材料分析化学;(3)环境分析化学;(4)矿产资源分析化学;(5)流程工业中的在线分析和自动调控;(6)毒品和安全分析化学;(7)宇宙和星际分析化学等。

流程工业(Process Industry)即化学合成和分离工业,包括石油工业、化工原料、精细化工和新医药产业、化学纤维、合成塑料、合成橡胶等高分子产业、黑色和有色冶金、污水处理、废气净化、气体分离、海水淡化等多个行业。我国流程工业占全部制造业的比重是 46.9%,制造业占全部工业 GDP 的比重是 79.69%,占全国 GDP 的比重是 35.75%。

所以化学合成和分离工业的增加值占全国 GDP 的 16.6%,在国民经济中的地位非常重要。化学合成工业的最大问题是要绿色化,从环境污染转化到环境友好,从资源浪费转化到“原子经济”、“循环流程”、“无废物工艺”,这些都需要高新技术的研究。所以这次中长期科学和技术发展规划中,曾经与多名院士联名建议把“流程工业的绿色化和信息化”作为一个高新技术发展的重大专项提出来,其中有大量的分析化学问题要解决。

因此现代分析化学的内涵大大扩充了,早已不

限于元素的定性和定量分析,而是包括一级结构序列的分析,高级结构的测定,形貌分析,手性分析,构型、构象分析,单原子和单分子分析,物质的成像等。

物理化学、理论化学、计算化学要为解决21世纪化学的四大难题做出重要贡献。计算化学与分析

化学交叉的化学计量学非常重要,可以优化处理分析数据,大幅度提高分析化学的精确度。

[附记]本文是作者于2004年7月7日在青岛召开的“分析化学前沿暨纪念高小霞院士诞辰85周年研讨会”上的发言。

ANALYTICAL CHEMISTRY FRONTIER IN 21ST CENTURY

Xu Guangxian

(College of Chemistry, Peking University, Beijing 100871)

Abstract In this paper, the importance of analytical chemistry is elucidated. The puzzles and challenges in analytical chemistry and the developing strategy of analytical chemistry in 21st century were specially inspected.

Key words analytical chemistry, puzzle and challenge, developing strategy of analytical chemistry

·资料·信息·

中比科学家在分子发光材料理论研究方面的合作取得重要进展

在国家自然科学基金重大国际合作项目等资助下,中国科学院化学研究所帅志刚研究员与比利时蒙斯-艾诺大学 Jean-Luc Brédas 教授和 David Beljonne 博士合作,在分子发光显示材料效率的理论研究中取得重要进展,其合作研究结果最近发表在国际著名刊物 *Advanced Functional Materials* (《先进功能材料》2004, 14: 684) 和 *Physical Review Letters* (《物理综述快讯》2004, 93: 066803) 上。

他们的这一合作研究结果更加明确地指出高分子的电致发光效率可以远远大于自旋统计给出的25%极限,从而揭示了分子发光显示材料工业的广阔发展前景。该理论研究结果引起了国际电子工业界的广泛关注。2004年4月14日,大型全球性网站“电子工程时代”(EE TIMES)以“*Theory promises brighter plastic light-emitting-diodes*”(理论许诺更亮的塑料发光二极管)为题详细报道了这一重要成果。英国、法国、德国和中国台湾等国家和地区的近10个相关网站以及国际半导体工业界著名新闻杂志 *Solid State Technology* (2004年7月)上进行了转载、翻译和报道。相关网站评论指出,“分子发光理论的一个新进展表明电致发光效率可以大大增加,从而

大力推进目前柔性显示的研究,并可以大大降低目前昂贵的平板显示材料的费用。新理论来自比利时蒙斯-艾诺大学、中国科学院分子科学中心(北京)和乔治亚理工学院的一项合作研究,并与实验科学家紧密合作,……”。

这项理论研究成果源于多年的国际合作研究。5年前,帅志刚研究员在比利时蒙斯-艾诺大学工作期间,曾与 Beljonne 博士和 Brédas 教授以及美国麻省理工学院的 Silbey 教授合作,从电子关联效应出发指出高分子的电致发光内量子效率可以超过25%的极限,从而引起了国际学术界的广泛关注。几年来国际上许多实验室一直在设计实验探测其微观机理,但这些实验结果存在许多分歧。尽管有几家实验室测量结果表明,单线态与三线态的比例可以高于1:3,但美国普林斯顿大学的 Forrest 教授和麻省理工学院的 Baldo 教授的实验表明,无论是小分子还是高分子,其电致发光内量子效率都小于25%;台湾地区学者的实验测量也表明在弱电场下,单线态的比例小于1:3,因此发光效率小于25%。

(国际合作局 吕蓓蕾 化学科学部 杨俊林 供稿)